

ОТЗЫВ

Научного руководителя на диссертационную работу Кюберис Александры Александровны «Колебательно-вращательные спектры малых молекул: высокоточные расчеты методами квантовой химии», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук 01.04.03 – Радиофизика.

Диссертационная работа А.А. Кюберис направлена на решение фундаментальной проблемы спектроскопии, связанной с как можно более точным теоретическим описанием спектров молекул. Подобное описание молекулярных спектров важно как для фундаментальной науки, так и для множества приложений, например для мониторинга парниковых газов и расчета радиационного баланса земной атмосферы, а также для исследования атмосфер экзопланет. Прецизионные измерения и расчеты параметров спектральных данных - частот линий, интенсивностей, параметров уширения и сдвигов линий давлением, столкновительных связей линий и их температурных зависимостей, непосредственно влияют на точность интерпретации как астрофизических результатов, так и результатов дистанционного зондирования атмосферы. С развитием технических возможностей точность экспериментальных данных возрастает, что накладывает повышенные требования и к теоретическим данным, которые используются для анализа эксперимента. Достижение экспериментальной точности расчетов из первых принципов является "светлой целью" теоретической спектроскопии. Поэтому создание теоретического подхода, свободного от использования экспериментальных данных и гарантирующего достижение экспериментальной точности в любом частотном диапазоне, является актуальной и приоритетной задачей этой области науки.

Работа А.А. Кюберис посвящена развитию теоретических методов спектроскопии малых молекул с целью достижения глобального описания спектров их колебательно-вращательных (КВ) переходов, затрагивающих уровни в широком диапазоне энергии (вплоть до значений, близких к энергии диссоциации) с экспериментальной точностью. Кюберис А.А. был проведен большой объем работ теоретических исследований, общей целью которых было создание и формулировка подхода, который позволит описывать КВ уровни энергии с экспериментальной точностью. Также была проведена апробация нового метода на нескольких объектах, например, на молекуле воды, молекулярном ионе H_2F^+ и молекуле аммиака. Также представлена процедура расчета списка линий на примере двух изотопологов молекулы воды H_2^{17}O , H_2^{18}O .

Научные положения и выводы диссертации А.А. Кюберис достаточно аргументированы и обуславливаются высокой точностью воспроизведения с их помощью больших массивов экспериментальных данных, а также их хорошим согласованием с предшествовавшими настоящей работе расчетами других исследователей. Особенно следует здесь отметить совпадение измеренных частот и интенсивностей спектральных линий с приведенными в этой работе расчетами в тех случаях, когда эксперименты проводились после опубликования указанных расчетов. Проведенная работа опирается на известные и апробированные методы, применяемые в теоретической молекулярной спектроскопии. Полученные результаты известны специалистам как в России, так и за рубежом; они неоднократно обсуждались на российских и международных конференциях, а также опубликованы в ведущих реферируемых научных журналах и в трудах конференций, а также обсуждались на семинарах в ИПФ РАН.

Проведенные А.А. Кюберис исследования отличает несомненно высокий научный уровень. Полученные результаты отражены, в частности, в 4 статьях в ведущих научных журналах и в более чем 9 докладах, в том числе доложенных ей лично на ряде крупных российских и международных конференций и совещаний. Результаты, представленные в диссертации, использовались при выполнении научно-исследовательских работ, поддержанных грантами РФФИ, а также поддерживались на конкурсной основе стипендиями им. Академика Г. А. Разуваева.

Необходимо также сказать несколько слов о работе А.А. Кюберис вне рамок диссертационной работы. Она является соавтором около 25 статей в реферируемых журналах, большая часть которых не вошла в диссертацию. Такое большое количество высококачественных работ отражает необыкновенную работоспособность, высокую квалификацию и талант исследователя. Блестящие результаты, полученные ею во время визитов в зарубежные лаборатории и в высшей степени положительные отзывы принимающих эти визиты профессоров также являются важной характеристикой А.А. Кюберис как научного работника.

На основании вышеизложенного считаю, что представленная диссертационная работа «Колебательно-вращательные спектры малых молекул: высокоточные расчеты методами квантовой химии» полностью соответствует выбранной специальности 01.04.03 – радиофизика и критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, а ее автор, А.А. Кюберис, несомненно заслуживает присвоения искомой степени кандидата физико-математических наук.

Кандидат физико-математических наук,

Ведущий научный сотрудник


О.Л. Полянский

Email: o.polyansky@ucl.ac.uk

Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук» (ИПФ РАН)

Адрес: 603950, г. Нижний Новгород, БОКС-120, ул. Ульянова, 46

Подпись к.ф.-м.н. Полянского О.Л. удостоверяю

Ученый секретарь ИПФ РАН,

Кандидат физико-математических наук




И.В. Корюкин